Travaux Pratiques
Modèles Cristallins illustrés par le logiciel ChimGéné

Travail à Réaliser

A l'aide du logiciel de simulation ChimGéné étudier des structures cristallines suivantes :

A-Structures métalliques

Les métaux Cu, Ca, Ag, Pd cristallisent dans un système cubique à faces centrées

1- Construire la maille du Cu
2- Combien une maille contient-elle d'atomes de cuivre ?
3- Donner des coordonnées réduites des atomes
4- Calculer la compacité du Cu

Les métaux Zn, Hg, Cd cristallisent dans un système hexagonal compact

1- Construire la maille de Zn (base hexagonale)
2- Déterminer le nombre d'atomes par maille
3- Déterminer la coordinence du Zn

B-Structures ioniques

Pour toutes les structures ioniques suivantes : NaI, ZnS blende et CaF_2,

1- Dessiner la maille élémentaire des structures en prenant à l'origine l'anion puis le cation
2- Déterminer les coordonnées réduites de chaque ion.
3- Déterminer en fonction du paramètre a de la maille les plus courtes distances entre ions de charges opposées et entre ions de même charge.
4- Donner la coordinance de chacun des ions par rapport aux ions de charge opposée.

NB : Compte rendu à envoyer par mail à l'adresse souad.elkhattabi@usmba.ac.ma avant 18h30 vendredi 26 mars 2020

Rappel : Chaque Compte rendu doit être structuré comme suit :

Intitulé de la simulation

Noms et prénoms

Objectifs du TP

Méthodologie

Réponse aux questions

Conclusion